Arbeitstagung
Statis[illegible]che Physik
v. 15.-18 [illegible] 1974 in Leipzig

BERICHT ÜBER KÜRZLICH BEWIESNE ENTROPIEUNGLEICHUNGEN

Uhlmann, Armin

Sektion Physik der Karl-Marx-Universität,Leipzig, DDR und

Vereinigtes Institut für Kernforschung, Laboratorium für

Theoretische Physik, Dubna, UdSSR.

Zusammenfassung

In den letzten Jahren, besonders aber 1973 wurden Vermutungen über Eigenschaften der Entropie bewiesen, die von grundsätzlichem Interesse sind. Ohne auf die zum Teil komplizierten Beweise eingehen zu können, werden diese neuen Entwicklungen in Quantentheorie und -statistik beschrieben.

Einleitung: Der klassische Fall.

Wir wollen zur Einleitung den klassischen diskreten Fall betrachten. Die hier einzuführende Sprechweise für Situationen, wie sie auch in der Wahrscheinlichkeits- und Informationstheorie auftreten, sollen nur den Übergang zum nicht-kommutativen Fall, der in der Quantentheorie vorliegt, als eine Verallgemeinerung erkennen lassen. Sie bringen, für sich gesehen, natürlich nichts Neues.

Ein (gemischter) "Zustand"eines klassischen Systems, das n reine Zustände annehmen kann, ist eine Wahrscheinlichkeitsverteilung

(1) $$f = \{p_i\}, \quad p_i \geq 0, \quad \sum_{i=1}^{n} p_i = 1$$

Tritt der Fall ein, daß alle p_i bis auf eines (welches dann gleich 1 ist) verschwinden, so sprechen wir von einem "reinen Zustand". Eine "Observable" a ist eine Funktion auf den Zahlen 1 bis n . Ist a_i der Wert der Observablen an der Stelle i , so heißt die Zahl

(2) $$f(a) = \sum_{i=1}^{n} a_i p_i$$

"Erwartungswert" der Observablen a im Zustand f .

Als "Entropie" eines Zustandes f bezeichnen wir die Zahl

(3) $$S(f) = -\sum p_i \ln p_i$$

die nach (1) nie negativ werden kann. Sind f und g zwei Zustände, die durch die Wahrscheinlichkeitsverteilungen $\{p_i\}$ und $\{p_i'\}$ gegeben sind und ist $0 \leq q \leq 1$, so ist durch $\bar{p}_i = (1-q)p_i + q p_i'$ ein neuer Zustand gegeben, der mit $(1-q)f + qg$ bezeichnet wird und eine "Mischung" (z.B. im Sinne von Gibbs) der Ausgangszustände ist. Weil dann immer

(4) $$S((1-q)f + qg) \geq (1-q)S(f) + qS(g)$$

gilt, sprechen wir von der Konkavität der Entropie. Im übrigen ist $S(f)=0$ genau dann, wenn f ein reiner Zustand ist.

Betrachten wir jetzt ein System mit $n \cdot m$ reinen Zuständen, bzw. Zustände

(5) $$f = \{p_{ij}\}, \quad i=1,\dots,n, \quad j=1,\dots,m$$

und interpretieren wir diese Situation so, daß wir sagen, das System sei aus zwei Teilsystemen "zusammengesetzt", die die Indizes $i=1,\dots,n$ und $j=1,\dots,m$ tragen. Wollen und können wir nun das erste Teilsystem beobachten, so wählen wir Observable a mit der Eigenschaft $a_{ij} = a_{ij'}$ wieimmer auch j und j' gewählt seien. Diese Observablen beachten den zweiten Index nicht und 'sehen' nur das erste Teilsystem.

Dann ist offenbar

(6) $$f(a) = \sum_{i,j} p_{ij} a_{ij} = \sum_{i=1}^{n} a_{i1} p_i^{I}$$
$$\text{mit} \quad p_i^{I} = \sum_{j=1}^{m} p_{ij}$$

Nun ist $\{p_i^{I}\}$ ein Zustand f^{I} des ersten Teilsystems $(i=1,\dots,n)$ und f^{I} bzw. $\{p_i^{I}\}$ heißt die "Reduktion" von f auf das betrachtete Teilsystem. Ebenso definieren wir f^{II} .

Bemerkenswerterweise kann die Reduktion eines reinen Zustandes durchaus einen gemischten Zustand ergeben! Man wird nun auch die Entropien der reduzierten Zustände betrachten, z.B. also $S(f^{I}) = -\sum p_i^{I} \ln p_i^{I}$ und nabh ihrer Relation zu $S(f)$ fragen. Es zeigt sich dann, daß

(7) $$S(f^{I}) = \sup_{g} S(g) - \ln m$$

gilt, wobei σ alle diejenigen Zustände des Gesamtsystems durchläuft, deren Reduktion mit ρ^{I} übereinstimmt: $\sigma^{I} = \rho^{I}$

Weiterhin gilt die Subadditivitätsbeziehung

$$(8) \qquad S(\rho) \leq S(\rho^{I}) + S(\rho^{II}) ,$$

die wiefolgt gedeutet werden kann: Die rechte Seite ist die Entropie des Zustandes $\{p_i^{I} \cdot p_j^{II}\}$ bei dem die beiden Teilsysteme untereinander völlig unkorrelliert sind, während im allgemeinen ρ ein Zustand ist, indem die Teilsysteme nicht unabhängig voneinander betrachtet werden können ohne Bindungen zwischen ihnen zu zerstören.

Oben haben wir angenommen, daß die beiden Teilsysteme fremd zueinander sind. Der allgemeinere Fall führt auf die starke Subadditivität der Entropie. Sei

$$(9) \qquad \rho = \{p_{ijk}\}$$

ein Zustand eines Systems und seien analog zu

$$(10) \qquad \rho^{1} = \{p_i^{1} = \sum_{jk} p_{ijk}\} , \quad \rho^{23} = \{p_{jk}^{23} = \sum_i p_{ijk}\}$$

die Reduktionen von ρ auf die entsprechenden Untersysteme ausgeführt. Dann gilt tatsächlich

$$(11) \qquad S(\rho) + S(\rho^{2}) \leq S(\rho^{12}) + S(\rho^{23})$$

Um sich diese Ungleichung analog zu (8) zu veranschaulichen, stellt man sich zunächst das Gesamtsystem in drei fremde Teilsysteme I,II,III zerlegt vor und betrachtet die Reduktion auf die Teilsysteme I⊗II und II⊗III , die wiederum II als ein gemeinsames Teilsystem besitzen.

Die Gültigkeit von (1o) in der Quantenstatistik wurde zuerst von Lanford und Robinson [4] siehe auch [2] vermutet und

nach einer Reihe von Versuchen [3 – 6] , die zu Teilerfolgen führten, von Lieb und Ruskai [7 – 9] bewiesen.

<u>Definition und Eigenschaften der Entropie</u>.

In der Quantentheorie tritt an die Stelle der Indizes $i=1,\dots,n$ der n-dimensionale Hilbertraum $\mathcal{H}_n$. Die Observablen sind die hermitischen Operatoren, die $\mathcal{H}_n$ in sich abbilden. Es ist jedoch zweckmäßig, gleich <u>alle</u> linearen Operatoren a , die $\mathcal{H}_n$ in sich abbilden, zu betrachten. Sie bilden eine sog. *-Algebra (und zwar einen besonders elementaren Fall eines solchen Gebildes) $\mathcal{A}$, da (i) mit $a \in \mathcal{A}$ auch $\lambda a \in \mathcal{A}$ mit komplexer Zahl λ , (ii) mit $a, b \in \mathcal{A}$ auch $a + b \in \mathcal{A}$ und $a \cdot b \in \mathcal{A}$ sowie (iii) mit $a \in \mathcal{A}$ auch $a^{*} \in \mathcal{A}$ gilt (a^{*} bezeichnet den zu a hermitisch konjugierten Operator). Nach Wahl eines beliebigen, aber festen Orthonormalsystems aus $\mathcal{H}_n$ können wir $\mathcal{A}$ auch als Gesamtheit aller $n \times n$ -Matrizen mit der üblichen Matrizenaddition und -multiplikation betrachten.

Im Folgenden sei $\mathcal{A}$ eine beliebige Menge von linearen Operatoren aus $\mathcal{H}_n$ bzw. von $n \times n$ -Matrizen, die die Forderungen (i),(ii) und (iii) erfüllt und daher eine *-Algebra ist. Die "Observablen" sind die hermitischen Elemente aus $\mathcal{A}$, für die definitionsgemäß $a = a^{*}$ gilt. Ein "Zustand" ρ ist durch die Angabe der "Erwartungswerte" $\rho(a)$ für alle $a \in \mathcal{A}$ bestimmt und erfüllt die Bedingungen: (A) ρ ist linear in a , (B) $\rho(a) \geq 0$ wenn $a = b^{*} b$ mit einem $b \in \mathcal{A}$ geschrieben werden kann (d.h. wenn a eine positiv semidefinite Matrix ist) und (C) ρ ist normiert, d.h. $\rho(e) = 1$ für das Einselement von $\mathcal{A}$. Ist nur (A) und (B) aber nicht notwendig (C)

erfüllt, so heißt f "positive Linearform über $\mathcal{A}$ ".
Es gibt über $\mathcal{A}$ eine ausgezeichnete positive Linearform, die "Spur von $\mathcal{A}$ " heißt und deren Werte mit $\mathrm{Sp}_{\mathcal{A}}(a)$ bezeichnet werden. Besteht $\mathcal{A}$ aus allen $n \times n$-Matrizen, so ist $\mathrm{Sp}_{\mathcal{A}}$ ihre übliche Spur. Im allgemeinen ist $\mathrm{Sp}_{\mathcal{A}}$ die kleinste positive Linearform, deren Werte für alle Projektoren $q = q^* = q^2$ aus $\mathcal{A}$ natürliche Zahlen sind. $n = \mathrm{Sp}_{\mathcal{A}}(e)$ heißt die "Dimension von $\mathcal{A}$ " und wird mit $\dim \mathcal{A}$ bezeichnet.
Ist f eine beliebige positive Linearform über $\mathcal{A}$, so gibt es genau ein Element $\varrho \in \mathcal{A}$ mit

$$(12) \qquad f(a) = \mathrm{Sp}_{\mathcal{A}}(a\varrho)$$

und ϱ heißt "Dichtematrix" oder auch "Dichteoperator" von f .
(Ist f ein Zustand, so ist die Spur von ϱ gleich 1 .)
Diese etwas komplizierte Definition der Dichtematrix ist besonders dann nötig, wenn wir nicht alle hermitischen Matrizen als Observable - und damit in $\mathcal{A}$ liegend - ansehen dürfen, da in solchen Fällen das obige Verfahren eine <u>eindeutige</u> Dichtematrix liefert, die allen physikalischen Forderungen gerecht wird. Ist übrigens $\mathcal{A}$ kommutativ, so können alle ihre Elemente simultan diagonalisiert werden und wir kommen genau auf den in der Einleitung besprochenen Fall zurück, wobei die Spur, wie (2) anzeigt, Summierung der Diagonalelemente ist.
Wir definieren nun mit (12) die "Entropie eines Zustandes"

$$(13) \qquad S(f) = -\mathrm{Sp}_{\mathcal{A}}(\varrho \ln \varrho)$$

was möglich ist, da ϱ positiv-semidefinit ist.
Ihre einfachsten Eigenschaften sind:

$$(14a) \qquad S(f) \geq 0$$

$$(14b) \qquad S([1-q]f + qg) \geq (1-q)S(f) + qS(g), \quad 0 \leq q \leq 1$$

$$(14c) \qquad S(f+g) \leq S(f) + S(g)$$

$$(14d) \qquad S(\lambda f) = \lambda \cdot S(f) - f(e) \cdot \lambda \cdot \ln \lambda \quad , \lambda \geq 0$$

Ist f ein Zustand (Normierung ist notwendig!), so ist $S(f) = 0$ genau dann, wenn er ein reiner Zustand unseres Systems ist. Für den Fall der Algebra aller Operatoren über $\mathcal{H}$ bedeutet dies, daß $f(a) = \langle x, ax \rangle$ mit einem gewissen normierten Vektor x aus $\mathcal{H}$ ist. Allgemeiner ist f ein reiner Zustand genau dann, wenn aus einer Zerlegung $2f = f_1 + f_2$ in zwei Zustände f_i mit Notwendigkeit $f_1 = f_2 = f$ folgt. (Die reinen Zustände sind somit die extremalen Elemente der konvexen Menge aller Zustände.)
Sind f, f_i Zustände und gilt [10]

$$(15a) \qquad f = \sum p_j f_j \quad \text{mit} \quad p_i \geq 0 \quad \text{und} \quad \sum p_j = 1$$

mit <u>reinen</u> Zuständen f_i , so folgt

$$(15b) \qquad S(f) \leq -\sum p_j \ln p_j$$

und für gewisse Zerlegungen (15a), den Spektralzerlegungen von f , tritt Gleichheit ein. Auf diese Weise läßt sich die Entropie eines Zustandes als ein Infimum charakterisieren. Da, wie oben beschrieben, die reinen Zustände in der Menge aller Zustände geometrisch ausgezeichnet sind, ist der Wert $S(f)$ nur durch die Lage von f in der Menge aller Zustände bestimmt.
Eine ganz andere Kennzeichnung der Entropie als Infimum gibt übrigens die weiter unten noch angeführte Kleinsche Ungleichung (22).
Jetz führen wir noch den Reduktionsprozeß auf Teilsysteme durch. Wie im ersten Abschnitt wird ein "Teilsystem" durch seine Observablen $\mathcal{A}_0$ charakterisiert, die ebenfalls eine $*$-Algebra bilden (Forderungen (i) bis (iii)) . Streng genommen sind natürlich nur die hermitischen Elemente von $\mathcal{A}_0$ Observable.

Ein Teilsystem werde also durch eine $*$-Algebra gekennzeichnet, die in $\mathcal{A}$ enthalten ist: $\mathcal{A}_0 \subseteq \mathcal{A}$
Ist f ein positives Funktional über $\mathcal{A}$, so definiert $a \to f(a), a \in \mathcal{A}_0$, also die Einschränkung von f auf $\mathcal{A}_0$ ein positives Funktional über $\mathcal{A}_0$, das mit $f_{\mathcal{A}_0}$ bezeichnet wird. Eine Normierung (C) bleibt dabei genau dann erhalten, wenn das Einselement von $\mathcal{A}$ auch in $\mathcal{A}_0$ liegt.
Ist $Sp_{\mathcal{A}_0}$ die Spur von $\mathcal{A}_0$, so gibt es eine Dichtematrix ϱ_0 in $\mathcal{A}_0$ mit

(16) $$f_{\mathcal{A}_0}(a) = Sp_{\mathcal{A}_0}(\varrho_0 a)$$

Die Beschränkung $f_{\mathcal{A}_0}$ von f auf $\mathcal{A}_0$ heißt auch "Reduktion" von f auf $\mathcal{A}_0$ und ϱ_0 ist die "reduzierte Dichtematrix". Man beachte, daß im allgemeinen sowohl $\varrho \neq \varrho_0$ als auch $Sp_{\mathcal{A}} \neq Sp_{\mathcal{A}_0}$ ist. Ist beispielsweise $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ und $\mathcal{A}$ die Menge aller Operatoren von $\mathcal{H}$, $\mathcal{A}_1$ die Menge aller Operatoren der Gestalt $a_1 \otimes e_2$, $e_2 =$ Identität von $\mathcal{H}_2$, so führt die Reduktion genau auf die üblicherweise als reduzierte Dichtematrix bezeichnete Matrix.
Um Verwechslungen zu vermeiden ist es zweckmäßig, die Menge aller Zustände, die zu einer Observablenalgebra gehören, zu bezeichnen. Dies geschehe durch die Festlegung

(17) $$Z_{\mathcal{A}} = \text{Menge aller Zustände über } \mathcal{A}$$

Ist also z.B. $g_0 \in Z_{\mathcal{A}_0}$, $f \in Z_{\mathcal{A}}$, so bedeutet $f_{\mathcal{A}_0} = g_0$, daß g_0 die Reduktion von f auf das durch $\mathcal{A}_0$ charakterisierte Teilsystem ist. Analog zu (7) gilt nun für die Entropie folgender Satz. Sei $\mathcal{A}_0 \subseteq \mathcal{A}$ und enthalte $\mathcal{A}_0$ das Einselement von $\mathcal{A}$, dann gibt es ein Element $z_0 \in \mathcal{A}_0$ das mit allen Elementen von $\mathcal{A}_0$ kommutiert, so daß für

alle $f \in Z_{\mathcal{A}}$ gilt

(18) $$S(f_0) \geq S(f) + f(z_0) \quad , \quad f_0 = f_{\mathcal{A}_0}$$

Weiter existiert zu gegebenem f_0 genau ein $f \in Z_{\mathcal{A}}$ mit $f_{\mathcal{A}_0} = f_0$, für welches in (18) Gleichheit eintritt.
Sind die mit allen Elementen von $\mathcal{A}_0$ vertauschbaren Elemente von $\mathcal{A}_0$ lediglich die Vielfachen der Identität, so heißt $\mathcal{A}_0$ ein "Faktor". Für Faktoren gilt in (18)

$$f(z_0) = f(e) \cdot \{ \ln \dim \mathcal{A}_0 - \ln \dim \mathcal{A} \}$$

Die Beweise für alles Obige findet man u.a. in [6], [11].

<u>Die Subadditivität der Entropie.</u>

Die Kenntnis der bisherigen Sachverhalte reicht nicht, um zur starken Subadditivität der Entropie zu gelangen. Hier setzt das Werk von E.Lieb [12] ein, der bewies, daß für jedes hermitische $b \in \mathcal{A}$ die für alle positiven Elemente $a \in \mathcal{A}$ definierte Funktion

(19) $$F(a) = Sp_{\mathcal{A}} \exp \{ b + \ln a \}$$

konkav in a ist, d.h.

(20) $$F\left(\frac{a_1 + a_2}{2}\right) \geq \frac{1}{2} F(a_1) + \frac{1}{2} F(a_2)$$

gilt. Ist b nicht mit a vertauschbar, so überzeugt man sich leicht, daß F ein recht kompliziertes nicht-lineares Gebilde ist, dem man nur sehr schwer beikommt. Ist $d > 0$, so gilt sogar, wie Epstein [13] zeigen konnte, die noch schärfere Behauptung, daß

(21) $$F_s(a) = Sp_{\mathcal{A}} [d a^s]^{\frac{1}{s}} \quad , \quad 0 < s \leq 1$$

konkav in a ist.
Lieb und Ruskai konnten dann mit Hilfe der Konkavität von (19) und mehrfacher geschickter Anwendung der Kleinschen Ungleichung

(22) $$S(f) \leq Sp_{\mathcal{A}}\{\varrho' - \varrho - \varrho \ln \varrho'\} \quad \text{alle } \varrho' > 0$$

(ϱ ist der Dichteoperator zu f in $\mathcal{A}$) zeigen, daß

(23) $$f \to S(f) - S(f_{\mathcal{A}_0})$$

eine konkave Funktion von f ist, wenn $\mathcal{A}_0$ ein Faktor ist, der die Identität von $\mathcal{A}$ enthält.

Bei der Beschreibung der starken Subadditivität, die mit einer Verallgemeinerung der Golden-Thomsonschen Ungleichung [8] oder mittels der Konkavität von (18) [6] bewiesen werden kann, gehen wir von dem Fall aus, daß $\mathcal{A}$ die Gesamtheit aller linearen Operatoren über einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ ist und eine Zerlegung von $\mathcal{H}$ in ein direktes Produkt dreier Faktoren gegeben ist:

(24) $$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$$

Dann kennzeichnen die Hilberträume $\mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2, \mathcal{H}_2 \otimes \mathcal{H}_3$ und $\mathcal{H}_2$ auf natürliche Weise Untersysteme, denen wir die Algebren $\mathcal{A}_{12}, \mathcal{A}_{23}, \mathcal{A}_2$ zuordnen. Z.B. ist $\mathcal{A}_{12}$ diejenige Unteralgebra von $\mathcal{A}$, deren Elemente die Gestalt

$$\sum a_{i1} \otimes a_{i2} \otimes e_3$$

haben. Dabei sind a_{i1} bzw. a_{i2} lineare Abbildungen von $\mathcal{H}_1$ in $\mathcal{H}_1$ bzw. von $\mathcal{H}_2$ in $\mathcal{H}_2$ und e_3 ist die identische Abbildung von $\mathcal{H}_3$ auf sich. Ist $f \in Z_{\mathcal{A}}$ beliebig so haben wir bei dieser Lage der Unteralgebren stets

(25) $$(f_{\mathcal{A}_{12}})_{\mathcal{A}_2} = (f_{\mathcal{A}_{23}})_{\mathcal{A}_2} = f_{\mathcal{A}_2}$$

Man kann also bei der Berechnung des auf $\mathcal{A}_2$ reduzierten Zustandes auch erst nach $\mathcal{A}_{12}$ und dann erst auf $\mathcal{A}_2$ reduzieren, ohne das Ergebnis durch diesen Umweg zu verändern.

Weiter haben wir noch die Beziehung

(26) $$\mathcal{A}_{12} \cap \mathcal{A}_{23} = \mathcal{A}_2$$

und man kann sagen, daß (25) und (26) Aussagen über die gegenseitige Lage der Teilsysteme sind.

Nach diesen Vorbereitungen können wir die von Lieb und Ruskai bewiesene, für alle $f \in Z_{\mathcal{A}}$ geltende Ungleichung angeben:

(27) $$S(f) + S(f_{\mathcal{A}_2}) \leq S(f_{\mathcal{A}_{12}}) + S(f_{\mathcal{A}_{23}})$$

Die genannten Autoren bewiesen ebenfalls die Abschätzung

(28) $$S(f_{\mathcal{A}_1}) + S(f_{\mathcal{A}_3}) \leq S(f_{\mathcal{A}_{12}}) + S(f_{\mathcal{A}_{23}})$$

zu der, um eine gewisse Vollständigkeit zu erreichen, die schon etwas früher abgeleitete Ungleichung [5]

(29) $$S(f_{\mathcal{A}_{12}}) \geq |S(f_{\mathcal{A}_1}) - S(f_{\mathcal{A}_2})|$$

hinzugefügt werden sollte.

Für die Beweise müssen wir leider auf die angegebene Literatur verweisen. In [9] findet man schließlich noch eine Diskussion über Entropieungleichungen, die verschiedentlich vermutet wurden, aber nicht gelten. Hier findet man auch Hinweise zum kontinuierlichen Fall, der einige Besonderheiten aufweist.

Die schiefe Entropie.

Sei f ein Zustand über $\mathcal{A}$ mit Dichteoperator ϱ. Bei der Messung der Observablen $a = a^* \in \mathcal{A}$ des sich im Zustand f befindlichen Systems kommt es zu einem für die Quantentheorie charakteristischen Informationsverlust, der von der sogenannten Reduktion der Wellenfunktionen (der reinen Zustände) beim Meßprozess herrührt. Dieser Informationsverlust tritt nur dann ein, wenn $a\varrho \neq \varrho a$ ist. Er führt, wenn $a = \sum \lambda_j q_j$ mit $q_i = q_i^* = q_i^2$ und paarweise verschiedenem λ_i sowie $e = \sum q_j$ gilt (dies ist eine Spektralzerlegung von a), zu der neuen Dichtematrix

(30) $$\hat{\varrho} = \sum q_j \varrho q_j$$

Wigner und Yanase [15] führten nun ein Maß für die Nicht-Kommutativität von ϱ und a ein, das in ϱ und somit auch in f konkav ist und genau dann zu Null wird, wenn ϱ mit a vertauscht. Sie nannten es "schiefe Entropie" und definierten

(31) $$S(f,a) = \frac{1}{2} Sp_{\mathcal{A}} [a, \varrho^{\frac{1}{2}}]^2$$

falls ϱ die Dichtematrix des Zustandes f ist. $S(f,a)$ ist, wie schon gesagt, in f konkav. Letzteres folgt übrigens sofort aus dem schon Wigner und Yanase bekannten Spezialfall der Konkavität von (21) für $s = \frac{1}{2}$

Es ist bis jetzt noch nicht klar, wie 'natürlich' die Wahl der Funktion (31) für die genannten Zwecke ist. So schlug Dyson [16] die Verallgemeinerung

(32) $$S_p(f,a) = \frac{1}{2} Sp_{\mathcal{A}} [a, \varrho^p]\cdot[a, \varrho^{1-p}]$$

mit $0 < p < 1$ vor. Daß diese Funktion tatsächlich die gewünschte Konkavität in f bzw. in ϱ besitzt, konnte erst kürzlich positiv entschieden werden. Lieb [12], der den Zusammenhang dieses Problems mit Konkavitätseigenschaften von Funktionen vom Typ (19) erkannte, bewies sogar die Konkavität von

(33) $$\varrho \to Sp_{\mathcal{A}} \left\{ [a, \varrho^p]\cdot[a^*, \varrho^{1-p}] \right\}$$

für beliebige Elemente $a \in \mathcal{A}$.

Die Frage nach Eigenschaften der schiefen Entropie, die der Subadditivität der Entropie entsprechen, muß gegenwärtig noch als offen angesehen werden. Welche Bedeutung dem Begriff der schiefen Entropie zukommt (oder nicht zukommt), kann wohl noch nicht eingeschätzt werden.

Wie gemischt ist ein Zustand?

Kehren wir zunächst zu dem gerade berührten Meßprozeß zurück, bei dem ein Zustand f durch den Prozeß der Messung in einen anderen Zustand $\hat{f}$ übergeht.

Ein wenig allgemeiner kann man Zuordnungen vom Typ $f \to \hat{f}$ bzw. $\varrho \to \hat{\varrho}$, den (30) beschreibt, wiefolgt ansetzen. Seien b_i Elemente aus $\mathcal{A}$, für die gilt

(34a) $$\sum b_j b_j^* = \sum b_j^* b_j = e$$

Ist dann $f \in Z_{\mathcal{A}}$, so definieren wir

(34b) $$\hat{f}(a) = \sum_j f(b_j^* a b_j)$$

Sind die b_i die Projektoren einer Spektralzerlegung einer Observablen, so beschreibt $f \to \hat{f}$ die Auswirkung der Messung dieser Observablen auf den Zustand, indem sich das System vor der Messung befand. Es ist natürlich stets $S(\hat{f}) \geq S(f)$ und das Gleichheitszeichen tritt nur ein, wenn $f = \hat{f}$ ist. Es gilt aber noch mehr: Ist Ψ irgendeine Funktion auf $Z_{\mathcal{A}}$, für die gilt

(35) $$\begin{cases} \Psi(f) = \Psi(f^u) \text{ für alle unitären } u \in \mathcal{A} \\ f \to \Psi(f) \text{ ist konkav} \end{cases}$$

so folgt stets

$$\Psi(\hat{f}) \geq \Psi(f) \tag{36}$$

Dabei bezeichnet f^u den durch $f^u(a) = f(u^{-1}au)$ definierten Zustand.

Auf dieser Erscheinung aufbauend, nennen wir einen Zustand g "gemischter" oder auch "chaotischer" als einen anderen Zustand f und schreiben dafür

$$g \succ f \tag{37}$$

genau dann, wenn die Ungleichung $\Psi(g) \geq \Psi(f)$ für jede unitär-invariante konkave Funktion auf dem Zustandsraum gilt. [11]

Da die Entropie ein Beispiel einer solchen Funktion ist, erfordert die Gültigkeit von (37) viel mehr als die Entropieungleichung $S(g) \geq S(f)$, da es eine Vielzahl unitär-invarianter konkaver Funktionen auf $Z_{\mathcal{A}}$ gibt, die sich wesentlich von S unterscheiden.

Wir geben noch zwei Kriterien für das Bestehen von (37) an. Genau dann ist g gemischter als der Zustand f , wenn für alle Projektoren π aus $\mathcal{A}$ gilt

$$\sup_u g(u^{-1}\pi u) \leq \sup_u f(u^{-1}\pi u) \tag{38}$$

wobei u alle unitären Elemente aus $\mathcal{A}$ durchläuft.

Notwendig und hinreichend für (37) ist ferner die Existenz von unitären Elementen $u_j \in \mathcal{A}$ und positiven Zahlen p_j mit $\sum p_i = 1$ derart, daß

$$g = \sum p_i f^{u_i} \tag{39}$$

gilt.

Wir bemerken noch, daß die Relation "gemischter als" eine Halbordnung der Zustände, genauer der Klassen unitär-äquivalenter Zustände, induziert und beschließen unseren Exkurs in die Geometrie des Zustandsraumes $Z_{\mathcal{A}}$ mit einem weiteren Beispiel.

Ist der Zustand f_T durch den Dichteoperator

$$\varrho_T = Z^{-1} \exp\{-\beta H + \sum \xi_j F_j\}, \quad kT\beta = 1 \tag{40a}$$

a ben, so gilt

$$f_{T_2} \succ f_{T_1} \quad \text{für} \quad T_2 > T_1 > 0$$

und auch für $0 > T_1 > T_2$ falls negative Temperaturzustände existieren. Für andere Beispiele und weitere Kriterien verweisen wir auf die Literatur [6], [10], [17-19], [14].

Literatur.

1. Landford, O.E.; Robinson, D.W.: J. Math. Phys. 9(1968)112o
2. Ruelle, D.: Statistical Mechanics. Rigorous Results. New York - Amsterdam 1969
3. Baumann, F.; Jost, R.: in Problems of Theoretical Physics; Essays Dedicated to N. N. Bogoliubov. Moskau 1969
4. Baumann, F.: Helv.Phys.Acta 44(1971)95
5. Araki, H.; Lieb, E.H.: Commun.Math.Phys. 18(197o)16o
6. Uhlmann, A.: Wiss.Z.Karl-Marx-Universität Leipzig, Math.-Nat.R. 22(1973)139
7. Lieb, E.H.; Ruskai, M.B.: Phys.Rev.Letters 3o(1973)434
8. Lieb, E.H.; Ruskai, M.B.: J.Math.Phys. 14(1973)1938
9. Lieb, E.H.: Some Convexity and Subadditivity Properties of Entropy. To appear in Bull.Amer.Math.Soc.

1o. Uhlmann,A.: Rep.Math.Phys. 1 (197o)147

11. Uhlmann,A.: Wiss.Z.Karl-Marx-Universität Leipzig, Math.-Nat.R. 21(1972)421

12. Lieb,E.L.: Advances in Math. 11(1973)267

13. Epstein,H.: Commun.Math.Phys. 31(1973)317

14. Wehrl,A.: How chaotic is a state of a quantum system? Preprint, Wien 1972

15. Wigner,E.P.;Yanase,M.M.: Proc.Nat.Acad.Sci.USA 49(1963)91o

16. see: Jost,R.: in Essays in Theoretical Physics Dedicated to Gregor Wentzel. Chicago 197o

17. Kossakowski,A.: Rep.Math.Phys. 3(1972)247

18. Alberti,P.M.: Thesis, Karl-Marx-Universität,Leipzig 1973

19. Laßner,G.;Laßner,G.A.: On the Time Evolution of Physical Systems. Preprint, VIK, Dubna 1973, E2 - 7537